

F046356 OTKA PÁLYÁZAT ZÁRÓJELENTÉS
„Impulzustérbeli sűrűségmátrix-renormálásicsoport-algoritmus fejlesztése
és alkalmazása fermion modellekre”

Az OTKA pályázat kutatási tervének megfelelően a négyéves időszak alatt a sűrűségmátrixos renormálásicsoport-algoritmus (DMRG) számos fejlesztését végeztük el, kiváltképpen a kvantuminformációelmélet (QIT) összefüggéseinek alkalmazása mellett. E két terület kapcsolatát legjobban leíró ún. *összefonódottságot*, mely egyben a kvantum rendszerek alapvető tulajdonságait is megszabó mennyiség, hatékonyan alkalmaztuk spin és fermionrendszerek vizsgálatára rövid és hosszú távú kölcsönhatások figyelembevétele mellett. Kutatásaink mindezek tükrében interdiszciplináris jellegűek voltak, melyet jól tükröznek az általunk vizsgált szilárdtestfizikai, kvantumkémiai és statisztikus fizikai problémák. A numerikus vizsgálatok mellett számos esetben elvégeztük a modellek analitikus módszerekkel való közelítését is, így végső megállapításainkat az analitikus predikciók és numerikus számítások együtteseként alakítottuk ki. Fontos megjegyezni, hogy világszinten – legjobb tudomásom szerint – mindösszesen hat olyan DMRG kód létezik, mely hosszú távú kölcsönhatások kezelését is lehetővé teszi. Az alábbiakban az egyes területeken elért eredményeink felsorolása következik.

Algoritmikus fejlesztések:

Impulzustérbeli és kvantumkémiai fejlesztések:

(1) 2003-ban kidolgoztuk a dinamikusan kiterjesztett aktív tér (DEAS) módszert, amely lehetővé teszi a DMRG hatékony alkalmazását impulzustérbeli reprezentációban, valamint kvantumkémiai rendszerekre. E módszert 2004-ben folyamatosan továbbfejlesztettük, és a DMRG kiegészítő operátorainak egy új struktúráját alkottuk meg. Ennek segítségével a kezdeti iteráció renormálási folyamata során csak az aktív rácspontokat kell figyelembe venni, melynek révén a futásidő ismét egy nagyságrenddel csökkent és a program által kezelhető renormált blokk állapotok száma 3000-5000-re növekedett [1,2,16].

(2) A kvantumkémiai DMRG-hez egy olyan hullámfüggvény transzformációt dolgoztunk ki, melynek segítségével a szuperblokk-Hamilton operátor diagonalizálási lépésszáma akár tízszer-százszor kevesebb lehet. A DEAS módszerrel együtt az új eljárás révén a DMRG algoritmus már a kezdeti inicializációs lépések során is rendelkezik mindazon tulajdonságokkal, melyek korábban csak a véges rács felépítése után voltak elérhetők. Ez természetesen ismét ugrásszerű sebességnövekedést eredményezett [1,2,16].

(3) A kvantumkémiai alkalmazott CI-kifejtést (Configuration Interaction expansion) integráltuk a DEAS módszerbe, így egy új DMRG alapú CI-kifejtést dolgoztunk ki, mely lehetővé teszi a SCI, DSI,... stb. közelítésekben való számolások elvégzését. Az új módszer nagyban csökkenti a Hilbert-tér dimenziójának méretét és már az inicializálási folyamat révén elérhető a kvantumkémiai pontosság [2]. Az új algoritmust impulzustérbeli reprezentáció esetén is nagy hatékonysággal alkalmazható [1,2,16].

(4) A kvantumos rácspontok dinamikus rendezésére (DRO) kidolgoztunk egy új módszert, valamint megmutattuk, miként szolgál a DEAS algoritmus egyfajta interface-ként a jelenlegi kvantumkémiai módszerek és a DMRG között. Mindezen eredmények szintén részei a [2,16] publikációnak.

(5) A végtelen dimenziós Hubbard-modellt tanulmányoztuk a DMRG impulzustérbeli verziójával (MS-DMRG) a véletlen diszperziós közelítésben (Random Dispersion Approximation(RDA)). Az elsődleges számítások alapján a rácspont entrópia eloszlása nagyon felborul a véletlen rendezés következtében, így legalább $N=40-60$ rácspontot tartalmazó rendszereket kell vizsgálni 4000-5000 blokk állapot mellett. Ez a kutatási és fejlesztési irányvonal folyamatban van.

Valós térbeli fejlesztések:

(1) A DMRG valós térbeli változatát tovább általánosítottuk, így jelenleg bármilyen két-rácspont operátorral leírható Hamilton-operátor számolását el tudjuk végezni. Példaként említve az új verzióval elsőként az $SU(N)$ Hubbard-modell, az S-1 bilineáris-bikvadratikus modell, valamint S-spinű Heisenberg láncok

tanulmányozását kezdtük meg. Az említett modellekre a kritikus tartományok miatt a megfelelő numerikus pontosság elérése több száz, illetve ezer renormált blokkállapot kezelését kívánja meg.

(2) A végtelen dimenziós Hubbard-modellt tanulmányoztuk a DMRG-vel és a valóstérbeli kétdimenziós modellt vizsgáltuk hosszú távú kölcsönhatások mellett, melyben az egyrészecskés kölcsönhatási mátrix komplex értékeket is felvesz. Ehhez kidolgoztuk a DMRG programom komplex változatát és implementáltuk a modellt. Az analitikus eredményeket rövid láncokra reprodukáltuk, hosszabb rendszerekre a kutatás folyamatban van. (Mott-Hubbard metal-to-insulator transition in the infinite dimensional Hubbard model, Ö. Legeza, F. Gebhard and R. M. Noack.)

(3) Kétdimenziós rendszerekre köztudottan a DMRG még nem elég hatékony. E probléma vizsgálatához a 2D Hubbard-modellt átdolgoztuk Hartree-Fock reprezentációba és az így előállított rendszert tanulmányoztuk a kvantumkémiai DMRG-vel. Ez a kutatási irányvonal szintén folyamatban van.

(4) Mindezek mellett, szintén jelentős munkaidőt töltöttem el a számítógépes cluster-ünk fejlesztésével és bővítésével. Az új node-ok 64 bites operációs rendszerben működnek, amihez a DMRG programom 64-bites verzióját is kidolgoztam és teszteltem.

Kvantuminformáció-elmélet és szilárdtestfizika:

(1) 2003-ban elsőként alkalmaztuk a kvantuminformáció-elméletet a sűrűségmátrix renormálás csoport (DMRG) algoritmus területén, mely kutatási irányvonalat tovább folytatva a legáltalánosabb elméleti és numerikus közelítést adtuk meg a kvantum-adatkompresszióknak. Az elmélet általánosítása révén egymástól nem független sűrűségmátrixokkal megalkotott üzenetek (konfigurációs terek) Neumann-entrópia szerinti tömöríthetősége adható meg egy előre meghatározott jósági tényezőnek megfelelően. Elsőként a valós térbeli 1D Hubbard-modellt tanulmányozva megmutattuk: annak ellenére, hogy a teljes entrópia nem egyenlő a rácspont entrópiák összegével, a DMRG blokk entrópia és a blokk állapotok száma, illetve a DMRG blokk entrópia és a teljes rendszer Hilbert-tér dimenziója között egy egyszerű összefüggés áll fenn. Az elérhető információ alsó (Józsa) és felső korlátjának (Holevo-bound) DMRG-re való alkalmazásával a renormálási folyamatra egy új vágási és kiválasztási eljárását alkottunk meg, melynek révén lehetővé vált a numerikus pontosság kvantuminformáció-veszteség szerinti extrapolációja. Eredményeinket jóval bonyolultabb, nem lokális kölcsönhatásokat tartalmazó kvantumkémiai rendszerekre is alkalmaztuk [1].

(2) A renormálási folyamat információ veszteségét vizsgálva megmutattuk, hogyan változik a DMRG blokk entrópiája a blokk méretének növekedésével. Eredményeink alapján kimutattuk azt, hogy a rácspont entrópiák összege egyenlő a teljes renormálási folyamat információ-generálásával, mely entrópia összesszáma a DMRG konvergenciájára egy alternatív kritériumot biztosít. Mindezek szoros kapcsolatban állnak az ún. entanglement distillation és purification folyamatokkal, azaz a DMRG mikén állít elő jobb vagy rosszabb blokk állapotokat a rácspontok rendezésétől függően. Az entrópia összesszáma segítségével az irodalomban megtalálható legnagyobb számolásokat végeztük el kvantumkémiai rendszereken [1].

(3) Egy új eljárást dolgoztunk ki fázisátalakulások tanulmányozásához alacsony dimenziós kvantumos rácsmoделlekben, mely jóval hatékonyabban alkalmazható spin és fermion modellekben egyaránt, mint az energia gapek, rendparaméterek vagy az egyrácspontos (S1) entrópia tanulmányozása. A módszer lényege az, hogy egy hosszú kvantumos láncban két egymás mellett lévő rácspontra felírható Neumann-entrópia (S2) a fázisátalakulási pontoknál anomális viselkedést mutat. A módszert általánosítottuk l-hosszúságú blokk entrópia (S1) esetére is, mely szintén hatékonyan kezelhető DMRG-vel és a DBSS módszer segítségével. Ezen felül megmutattuk, hogy az egy-rácspontos entrópia által nem észlelt átalakulási pontok az l-rácspontos ($l>1$) Neumann entrópiákkal jól meghatározhatók. A módszert többféle spin és fermion rendszerre alkalmaztuk.

(4) A kommenzurábilis-inkommenzurábilis fázisátalakulás kimutatására dolgoztunk ki egy új módszert, melynek alapja a Neumann-féle kvantuminformációs entrópia véges rendszerre meghatározott profilja és annak Fourier spektruma. A módszer kritikus rendszerekre megadja a lágy módusok számát és azok hullámszámvektorait, míg gapes modellekre az alapállapot térbeli modulációjának periódusát. A módszer jóval hatékonyabban alkalmazható a fázisátalakulási pontok kimutatásához, mint a korábbi módszerek spin és fermion rendszerek esetében egyaránt [10].

(5) Az egy-dimeziós periodikus határfeltétel mellett meghatározott Hubbard modellre olyan unitér bázisfüggvény transzformációt dolgoztunk ki, melynek révén a modell nyitott határfeltétel mellett vizsgálható. Megmutattuk, hogy annak ellenére, hogy a transzformáció után a modell csak első és másodsomszéd kölcsönhatásokat tartalmaz, a DMRG-vel végzett számolások hatékonysága nem nő. Ezt azzal magyaráztuk meg, hogy a transzformáció után új csatolások jelentek meg a modellben, melyek mindegyike önálló kvantumcsatornát jelent és összefonódottságot termel, mely az információs Neumann entrópia növekedéséhez vezet. Az egyes kvantumcsatornák entrópia termelését egyenként megvizsgáltuk és ezek kihatását a DMRG algoritmusra nézve. A vizsgálatunk egy újabb lépést jelent a kvantumkémiai DMRG optimalizálása és fejlesztése terén [8].

Kvantumkémia:

(1) A DMRG speciális jellemzője az, hogy a renormált blokkok redukált sűrűségmátrixa kevert sűrűségmátrixokból állítható elő. Az olyan rendszerekben, melyekben az egyes alkotóelemek (rácspontok) eltérő kvantuminformáció tartalommal rendelkeznek, a redukált sűrűségmátrix alakja és információtartalma nagyban függ attól, hogyan következnek egymás után a különböző tulajdonságú rácspontok. Megmutattuk, miként jelennek meg az összefonódott állapotok a renormálási folyamat során és ezeket miként lehet a DMRG további optimalizálására felhasználni úgy, hogy már a kezdeti iteráció során a lehető legtöbb kvantuminformáció kinyerhető legyen a rendszerből [2]. Kvantumkémiai rendszereket tanulmányozva azonban kiderült, hogy pusztán az összefonódottság szerinti lokalizálás nem elegendő akkor, ha a rendszer hosszú távú kölcsönhatásokat tartalmaz. Az összefonódottság lokalizálása és a kölcsönhatás lokalizálása közötti versengő folyamatokat impulzustérbeli és kvantumkémiai rendszerek tanulmányozásával mutattuk meg, valamint kidolgoztunk egy új rendezési eljárást az egyrészescskés sűrűségmátrix felhasználásával [2, 16].

Szilárdtestfizika:

(1) Az ún. bilineáris és biquadrátikus spin-1 modell fázisdiagrammja régóta ismert, azonban Chubukov munkája óta még napjainkban is vita tárgyát lépezi egy esetleges spin nematikus fázis elhelyezkedése a ferromágneses és dimerizált fázisok között. A sűrűségmátrix- renormálásicsoport (DMRG) algoritmussal és az ún. dinamikus-szelektált-blokk-állapot (DBSS) módszerrel vizsgáltuk a ferromágneses és dimerizált fázis határát és a szakirodalomban megtalálható legpontosabb számításokat végeztük el. Eredményeink alapján a nematikus fázis nem létezik, hanem a dimerizációs rendparaméter exponenciálisan lassan tűnik el a ferromágneses fázis határához közeledve Kosterlitz-Thouless viselkedést mutatva [4].

(2) Semleges-ionos fázisátalakulást tanulmányoztuk olyan szerves porkeverékekben, melyekben egydimenziós szálaknak tekinthető struktúrákban donor és akceptor molekulák váltakozva követik egymást. Kidolgoztunk egy olyan egységes effektív spin modellt, mely a korábban fermion reprezentációban javasolt ionos Hubbard modell és a donor-akceptor modellt egyaránt leírja. Kiszámítottuk a releváns energia gapeket, ionicitást, rácspont entrópiát, két-rácspont entrópiát és a dimerizációs rendparamétert. Ezek alapján meghatároztuk a fázisátalakulások típusait, valamint az egységesített fázisdiagrammot [7].

(3) A DMRG módszerrel meghatároztuk a felületi spin korrelációs függvényt az S-3/2 antiferromágneses Heisenberg-láncban. Megmutattuk, hogy nagy rendszerek határesetében a korrelációk logaritmikusan nullához tartanak az ún. bulk és a felületi marginális operátorok következtében. Ennek alapján nincsen felületi rend, habár lokalizált vég gerjesztések vannak a modellben. Ez a gerjesztés meghatározza az első gap-et, amely logaritmikusan tűnik el. Összehasonlításként S-1/2 lánc végein elhelyezkedő S-1 szennyezések viselkedését is megvizsgáltuk, melyek eredményeink alapján azonos felületi univerzalitási osztályba sorolhatók. Megmutattuk, továbbá hogy félegész spinű modellekre a végspin logaritmikusan eltűnik ezáltal felületi rend nem létezik, mely ellentétben áll az spin-1 modellre találtakkal [5].

(4) A topologikus rendparamétert, a dimer rendparamétert és számos kvantuminformációs entrópiafüggvényt tanulmányoztuk frusztrált spin létrákban. Az új módszerünk [7,10] alkalmazásával kimutattunk dimerizált fázisokat a fázistér olyan szegmenseiben, melyeket a topológikus rendparaméter vizsgálata nem jelzett. Analitikus megközelítést használtunk a gyenge csatolású határesetben, melynek predikcióit pontosítottuk vagy zártuk ki a DMRG numerikus számítások alapján [14].

(5) A [7,10] módszert alkalmaztuk az egydimenziós t-t'-U Hubbard modellre az incommenzurábilis fázis tanulmányozása érdekében. Kimutattuk, hogy amennyiben a másodsomszéd átugrási tag amplitúdója (t')

nagyobb mint 0.5t az U Coulomb kölcsönhatás bármely értékére a rendszerben a spin gap is végezzé válik a töltés gap mellett. Ennek alapján a két Fermi-pont helyett megjelenő négy Fermi-pont releváns változást okoz a rendszer viselkedésében, mely az egyes von Neumann entrópia függvényekben is megjelenik. Kimutattuk, hogy t' bizonyos értéke felett inkompenzálható oszcillációk jelennek meg a rendszerben, melyek az entrópiafüggvényekben is megjelennek. Mindezek alapján meghatároztuk a modell kétdimenziós fázisdiagramját [10].

(6) A [11] tanulmány eredményei az elektron fonon kölcsönhatás figyelembe vétele nélkül készültek. Ennek ellenére egy szűk tartományra kimutattuk a dimerizált fázis létezését. Kísérleti eredmények alapján azonban, az ionos fázis teljes tartományában dimerizált fázis lenne elvárható. Ennek érdekében az elektron-fonon kölcsönhatást is figyelembe vettük, mely eddigi eredményeink alapján jól leírja a kísérleti eredményeket. Eredményeinket jelenleg Buchta Krisztián doktori disszertációja (2007, MTA-SZFKI, ELTE) tartalmazza, a kézirat beküldése pedig a közeljövőben várható (Effect of electron phonon interaction in organic mixed stack compounds: Ö. Legeza, K. Buchta, and J. Sólyom.)

(7) Az egydimenziós SU(n) Hubbard modellt vizsgáltuk numerikusan $n=2,3,4$ és 5 re félig-töltött, illetve $1/n$ betöltés mellett a DMRG algoritmussal. A munka során ismét a Neumann-féle kvantuminformációs entrópiát és az energia gapeket tanulmányoztuk. Megmutattuk, hogy félig töltött esetben a spin és töltés gapek végesek minden $n>2$ esetben $U>0$ -ra, illetve hogy $U_c=0$ -nál egy Kosterlitz-Thouless fázisátalakulással a rendszer egy kötés-dimerizált fázisba megy át páros és páratlan n esetében is. Az $1/n$ esetben viszont a rendszerek olyanok mint az SU(2), azaz a töltésgap exponenciálisan lassan nyílik ki $U_c = 0$ -nál, a spingap nulla és az alapállapot nem-dimerizált [6]. Ezen felül a [10]-ben felvázolt módszer alapján meghatároztuk az egydimenziós modell $n=2,3,4,5$, általános p/q kompenzálható betöltöttségekre a lágy módusok helyét avagy az alapállapot térbeli inhomogenitás jellegét. A numerikus eredményeket analitikus megközelítésekkel (bozonizáció) is megvizsgáltuk [13].

(8) A [7,10] módszert alkalmaztuk az egydimenziós kiterjesztett Peierls-Hubbard modellre. A számítások és a kutatás folyamatban vannak. (Entropic analysis of quantum phase transitions in the one-dimensional extended Peierls-Hubbard model, H. Bentien and Ö. Legeza.)

Statisztikus fizika:

(1) Egy L-hosszúságú blokk tulajdonságait tanulmányoztuk egy véges N-hosszúságú spin-1/2 XX modellben. A blokk és a rendszer további része között fennálló összefonódottságból adódó kvantumos fluktuációkat vizsgálva megmutattuk, hogy a rendszer további része mint egy termikus környezet is felfogható. Ily módon egy effektív hőmérsékletet definiáltunk. Analitikus és numerikus módszerek alkalmazásával megmutattuk, hogy az effektív hőmérséklet kielégíti azon alapvető elvárásokat, melyek két részrendszer összeillesztése során elváltak [12].

Oktatás:

2004-től az ELTE-n rendszeresen megtartottam a „Renormálási módszerek kvantum rendszerekre” című előadásomat, mely akkreditált előadás az ELTE és BME doktori iskola keretében is. Jelenleg egy hazai és egy németországi PhD diák munkáját segítem és irányítom.

Előadások: Számos hazai és külföldi egyetemen, valamint konferenciákon tartottam előadásokat (Budapest, Bonn, Marburg, Leiden).

Pályázatok:

A kutatómunka mellett igen jelentős időt fordítottam pályázatok írására: EURYI-2004, EURYI-2005, EURYI-2006 pályázat, tematikus OTKA, NF-2006 (nagy összegű ifjúsági) OTKA, EGC pályázatok.

Egyéb:

Az elmúlt négy év év során számos publikációm született, mely jól mutatja a DMRG programom hatékonyságát. Mindemellett elkészítettem a programom komplex verzióját is, mely a jövőbeni terveimnek

megfelelően a kvantum-Fourier transzformáció és az időfüggő (t-DMRG) tanulmányozásához és kifejlesztéséhez szükséges. Sajnos a programfejlesztés nagyon sok energiát és időt emészt fel, így a publikálás és a fejlesztési munka között kell „lavíroznom” a jövőben is, amennyiben nem tudok egy önálló kutatócsoportot létrehozni. Példaként említhetem, hogy az [1] publikációban nagy hatékonysággal alkalmazott algoritmikus fejlesztéseim egyes részleteit is csak a [2] publikáció tartalmazza, így a közeljövőben tervezem mindezek ismertetését a [16] publikációban, mely közel 80%-os kidolgozottság mellett 2004 óta várta magára!

sor-szám	Közleményjegyzék és statisztika	dokumentum típusa	impakt faktor	OTKA támogatás feltüntetve?
1.	Ö. Legeza, J. Sólyom: Quantum data compression, quantum information generation and the density matrix renormalization group method , Phys. Rev. B 70, 205118, 2004	folyóiratcikk	3.08	igen
2.	Ö. Legeza, J. Sólyom: The dynamically extended active space procedure , Recent Progress and Prospects in the Density Matrix Renormalization Group Method. http://dmrg.info/workshop , 2004	konferenciakiadvány	0.00	igen
3.	Ö. Legeza, J. Sólyom: Quantum data compression, quantum information generation and the density matrix renormalization group method , Virtual Journal of Quantum Information Theory. http://www.vjqtinfo.org , 2004	egyéb	0.00	igen
4.	K. Buchta, G. Fáth, Ö. Legeza, and J. Sólyom: Probable absence of a quadrupolar spin-nematic phase in the bilinear-biquadratic spin-1 chain. , Phys. Rev. B 72 054433, 2005	folyóiratcikk	3.08	igen
5.	G. Fáth, Ö. Legeza, F., P. Lajkó, and F. Iglói: Logarithmic delocalization of end spins in the $S=3/2$ antiferromagnetic Heisenberg chain , Phys. Rev. B 73, 214447, 2006	folyóiratcikk	3.08	igen
6.	K. Buchta, Ö. Legeza, E. Szirmai, and J. Sólyom: Mott transition and dimerization in the one-dimensional $SU(n)$ Hubbard model. , cond-mat/0607374, beküldve Phys. Rev. B, 2006	folyóiratcikk	0.00	igen
7.	Ö. Legeza, and J. Sólyom: Two-site entropy and quantum phase transitions in low-dimensional models. , Phys. Rev. Lett. 96, 116401, 2006	folyóiratcikk	7.30	igen
8.	Ö. Legeza, F. Gebhard and J. Rissler: Entanglement production by independent quantum channels. , Phys. Rev. B 74, 195112, 2006	folyóiratcikk	3.08	igen
9.	Ö. Legeza, F. Gebhard and J. Rissler: Entanglement production by independent quantum channels. , Virtual Journal of Quantum Information Theory, http://www.vjqinfo.org , 2006	egyéb	0.00	igen
10.	Ö. Legeza, J. Sólyom, L. Tincani, and R. M. Noack: Entropic analysis of quantum phase transition from uniform to spatially inhomogeneous phases. , Rev. Lett. 99, 087203, 2007	folyóiratcikk	7.62	igen
11.	Ö. Legeza, K. Buchta and J. Sólyom: Unified phase diagram of models exhibiting a neutral-ionic transition. , Phys. Rev. B 73, 165124, 2006	folyóiratcikk	3.08	igen
12.	V. Eisler, Ö. Legeza, and Z. Rácz: Fluctuations in subsystems of the zero temperature XX chain: Emergence of an effective temperature. , J. Stat. Mech. P11013, 2006	folyóiratcikk	3.08	igen
13.	E. Szirmai, Ö. Legeza, and J. Sólyom: Spatially nonuniform phases in the one-dimensional $SU(n)$ Hubbard model for commensurate fillings. , Phys. Rev. B 77, 045106 (2008).	folyóiratcikk	3.08	igen
14.	E. H. Kim, Ö. Legeza and J. Sólyom: Topological order, dimerization and spinon deconfinement in frustrated spin	folyóiratcikk	3.08	igen

	<i>ladder models.</i> accepted for publiaction, to appear in Phys. Rev.B (2008), cond-mat/0712.2730			
15.	Ö. Legeza, R. M. Noack, J. Sólyom, and L. Tincani: <i>Applications of Quantum Information in the Density-Matrix Renormalization Group.</i> , Lect. Notes Phys. 739 , 653-664 , Springer-Verlag Berlin Heidelberg (Chapter 24) , 2008	könyvfejezet		igen
16.	Ö. Legeza and J. Sólyom: <i>Configuration interaction based dynamically extended active space procedure (CI-DEAS).</i> , preprint, will be submitted to J. Chem. Phys., 2008	egyéb		igen